

## ipaMS – ein interdisziplinäres Zentrum für Molekül-Waagen

von / by

Dr. Hendrik Kersten



Vor etwas über einhundert Jahren war sich die naturwissenschaftliche Elite noch nicht einig, ob Atome als Materiebausteine tatsächlich existieren. Es war J.J. Thomson, der 1912 mit einer von ihm entworfenen Apparatur, einem „Massenspektrometer“, große Beiträge zur Beantwortung dieser Frage leistete. Mit dieser „Waage“ war Thomson in der Lage, einzelne Atome aufgrund ihrer individuellen Masse eindeutig zu identifizieren und sogar die Existenz von Isotopen nachzuweisen. Innerhalb der vergangenen 100 Jahre haben Massenspektrometer zahlreiche neue, vielfältige Modifikationen erfahren und in ihren unzähligen Anwendungen bis heute nichts an ihrer Aktualität verloren. Im Gegenteil. Warum ist das so? Weil sich mit Massenspektrometern auf faszinierende Art und Weise die elementaren Eigenschaften kleinster Materiebausteine beobachten lassen. Waren bis vor 30 Jahren nur spezifisch ausgebildete Experten in der Lage, diesen Maschinen sinnvolle Daten zu entlocken, so ist heute bei vielen Geräten nur noch ein Start-Stopp-Knopf zu drücken, und auf einem Display erscheinen molekulare Informationen über die vermessene Probe, wie etwa die Abfolge von Aminosäuren in einem Protein. Aus Bereichen wie der industriellen Prozessanalytik, der Pharmaindustrie, der Biomedizin, der Sicherheitstechnik, der Umwelt- und Lebensmittelanalytik – also Bereichen, in denen Informationen über die atomare und molekulare Zusammensetzung bis in den Spurenbereich einer Probe benötigt werden – sind diese Geräte nicht mehr wegzudenken.

Das interdisziplinäre Zentrum für reine und angewandte Massenspektrometrie (engl. institute for pure

and applied mass spectrometry, kurz: ipaMS) wurde 2011 von Prof. Dr. Thorsten Benter (Physikalische und Theoretische Chemie, Bergische Universität Wuppertal) und Prof. Dr. Oliver J. Schmitz (ehemals: Analytische Chemie, Bergische Universität; jetzt: Angewandte Analytische Chemie, Universität Duisburg-Essen) gegründet und wird seit 2017 von Dr. Hendrik Kersten (Physikalische und Theoretische Chemie) geleitet. Es entwickelt sich ein immer weiter expandierendes Netzwerk an Menschen, die „Massenspektrometrie“ im engeren oder weiteren Sinn betreiben oder daran interessiert sind. Dieses Netzwerk umfasst fakultätsübergreifend diverse Arbeitsgruppen der Bergischen Universität, Arbeitsgruppen und Institute anderer Universitäten bis hin zu global agierenden Unternehmen. Das ipaMS versteht sich als das verknüpfende Element dieses Netzwerkes.

Recherche, Generierung und nachhaltige Weitergabe von Wissen

Innerhalb der Massenspektrometrie und mit ihrer Hilfe ist im vergangenen Jahrhundert unglaublich viel erforscht worden. Leider ist auch unglaublich viel Literatur in der aktuellen Forschung nicht mehr „präsent“, sodass man sich selbst immer wieder dabei ertappt, das Rad neu zu erfinden. Hinzu kommt, dass aus Altersgründen eine ganze Generation von Expertinnen und Experten sowohl die akademischen Einrichtungen als auch die Massenspektrometerhersteller verlässt. Damit entstehen erhebliche Wissenslücken vor allem im Bereich detaillierter, praxisbezogener Erfahrung. Die Folgen

A little more than a century ago scientists disputed whether atoms, conceived as the basic building blocks of matter, really existed. Then, in 1912, J. J. Thomson designed a “mass spectrometer” – an apparatus that contributed greatly to answering this question by enabling atoms to be “weighed” and their masses individually determined. Thomson even demonstrated the existence of isotopes.

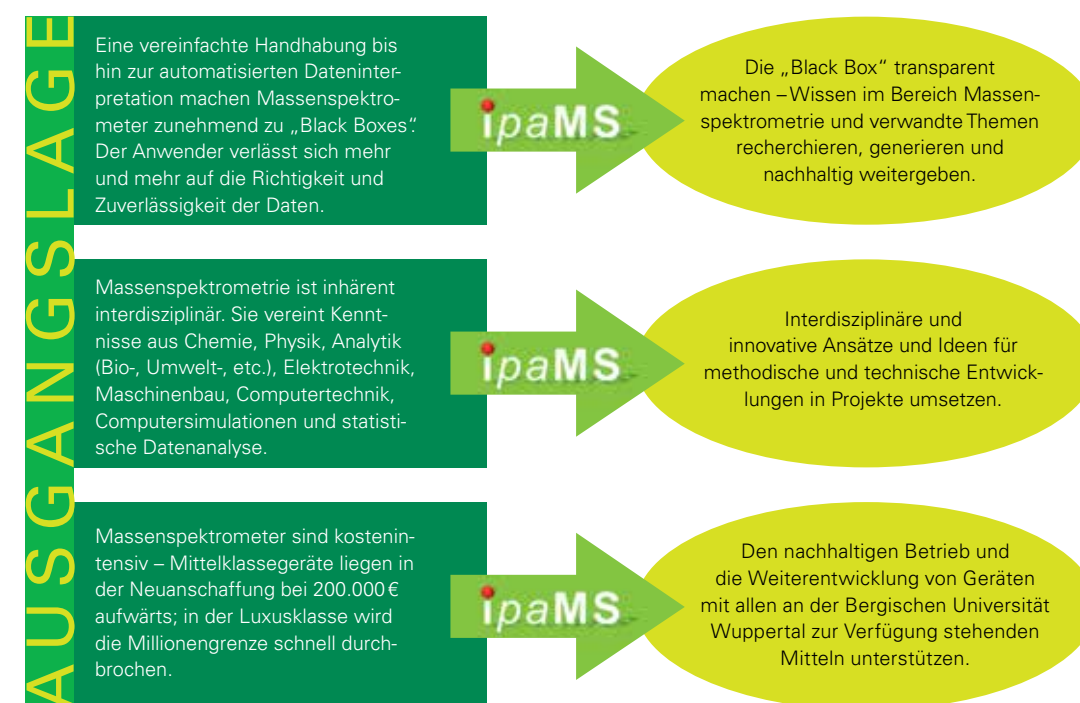
Over the past century mass spectrometers have been greatly developed and modified. In their countless appli-

cations they have lost none of their relevance for scientific research. On the contrary, the observations they allow of the elementary properties of the smallest building blocks of matter are as fascinating today as ever. While thirty years ago only specially trained experts could use these devices, today all that is often needed is a push on the start-stop button, and information about the molecular structure of the test sample – e.g. the amino acid sequence of a protein – appears on the display screen. In such diverse areas as industrial process analysis, the pharmaceutical industry,

dieses Prozesses sind aktuell besonders deutlich zu spüren. Das ipaMS möchte dieser Entwicklung durch intensives Recherchieren, Archivieren sowie Weitergabe und Bereitstellung von Wissen entgegensteuern. Wir pflegen gute, zum Teil sehr persönliche Beziehungen zu einigen „alten Hasen“ aus dem Umfeld der Massenspektrometrie und sind sehr dankbar für ihre Unterstützung. So stellte beispielsweise ein Unternehmen aus der Halblei-

terindustrie einen großzügigen Geldbetrag zur Verfügung, um spezielle Literaturrecherchen durchzuführen. Andere Unternehmen entleihen oder spenden dem ipaMS hochwertige Massenspektrometer zur Unterstützung der Grundlagenforschung und Vermittlung von Grundlagenwissen in diesem Forschungsumfeld. In den vergangenen sechs Jahren sind 20 Bachelorarbeiten, 15 Masterarbeiten und sieben Doktorarbeiten sowie zahl-

Abb. 1: Vorteile und Merkmale des interdisziplinären Zentrums für reine und angewandte Massenspektrometrie



biomedicine, safety engineering, and environmental and foodstuffs analysis – fields where information about the atomic and molecular composition of materials ranging from standard samples to trace elements is required – mass spectrometers are an indispensable piece of apparatus.

The University of Wuppertal's Institute for Pure and Applied Mass Spectrometry (ipaMS) was founded in 2011 by Prof. Dr. Thorsten Benter (Physical and Theoretical Chemistry, Wuppertal) and Prof. Dr. Oliver J. Schmitz

(formerly Analytic Chemistry, Wuppertal; now Applied Analytic Chemistry, University of Duisburg-Essen). Since 2017 the Institute has been directed by Dr. Hendrik Kerten (Physical and Theoretical Chemistry). The ipaMS coordinates an ever-expanding network of users – ranging from inter-faculty research groups from the University of Wuppertal and other universities to globally operating enterprises – who are interested, in a stricter or wider sense, in mass spectrometry and its applications.

reiche Publikationen und Präsentationen auf dem Gebiet aktueller massenspektrometrischer Forschung im Verbund des ipaMS erfolgreich abgeschlossen worden. Wir sind der Meinung, auf diese Weise Wissen nachhaltig weiterzugeben, zu vermehren und zu erhalten.

Im Master-Studiengang Chemie wird ein Schwerpunkt „Massenspektrometrie“ integriert. Die Anwendung dieser Technologie zur Aufspürung chemischer Kampfstoffe ist beispielsweise auch Teil der Bundeswehrausbildung in der Sicherheitstechnik. Wir halten weltweit Vorträge zum Thema Massenspektrometrie und veranstalten Workshops – so etwa 2016 für 30 Doktoranden des im EU-Marie Curie International Training Network Program geförderten CERN-Projekts CLOUD-TRAIN. Über vier Tage wurden zahlreiche Aspekte der Massenspektrometrie in ihrer inhärent fächerübergreifenden Vielfalt vorgestellt und intensiv diskutiert. Ein Highlight der Veranstaltung war die Möglichkeit, Massenspektrometer zu zerlegen – also die Black Box transparent zu machen – und wieder zusammenzubauen. Dies stellt häufig eine große Hürde angesichts der hohen Kosten für ein solches Gerät dar. Ein besseres Verständnis des „Innenlebens“ führt aber intrinsisch zu einer kritischeren Interpretation

und Bewertung gemessener Daten, denn Massenspektrometer sind letztendlich nur das: Geräte. Ende 2017 ist das ipaMS erfreulicherweise Partner des Folgeprojekts CLOUD-MOTION am CERN geworden. Ein weiteres Highlight war die Ausrichtung der Jahrestagung der größten nationalen Vereinigung für Massenspektrometrie (Deutsche Gesellschaft für Massenspektrometrie – DGMS) im Jahr 2015 in Wuppertal zusammen mit dem MPI Mülheim. Durch die viertägige Konferenz mit ca. 400 Teilnehmerinnen und Teilnehmern wird die Universität Wuppertal in der „Community“ nachhaltig positiv mit der Massenspektrometrie in Verbindung gebracht.

#### Methodische und technische Entwicklungen

In den vergangenen sieben Jahren sind etwa drei Millionen Euro (Geld- und Sachmittel) für die Grundlagenforschung, technische und Applikationsentwicklungen durch Drittmittelprojekte, Spenden und Leihgaben über das ipaMS an die Bergische Universität geflossen. Technische Entwicklungen wurden in Kooperation mit namhaften Unternehmen bis zur Marktreife geführt. Nicht zuletzt aufgrund der extrem hohen Professiona-

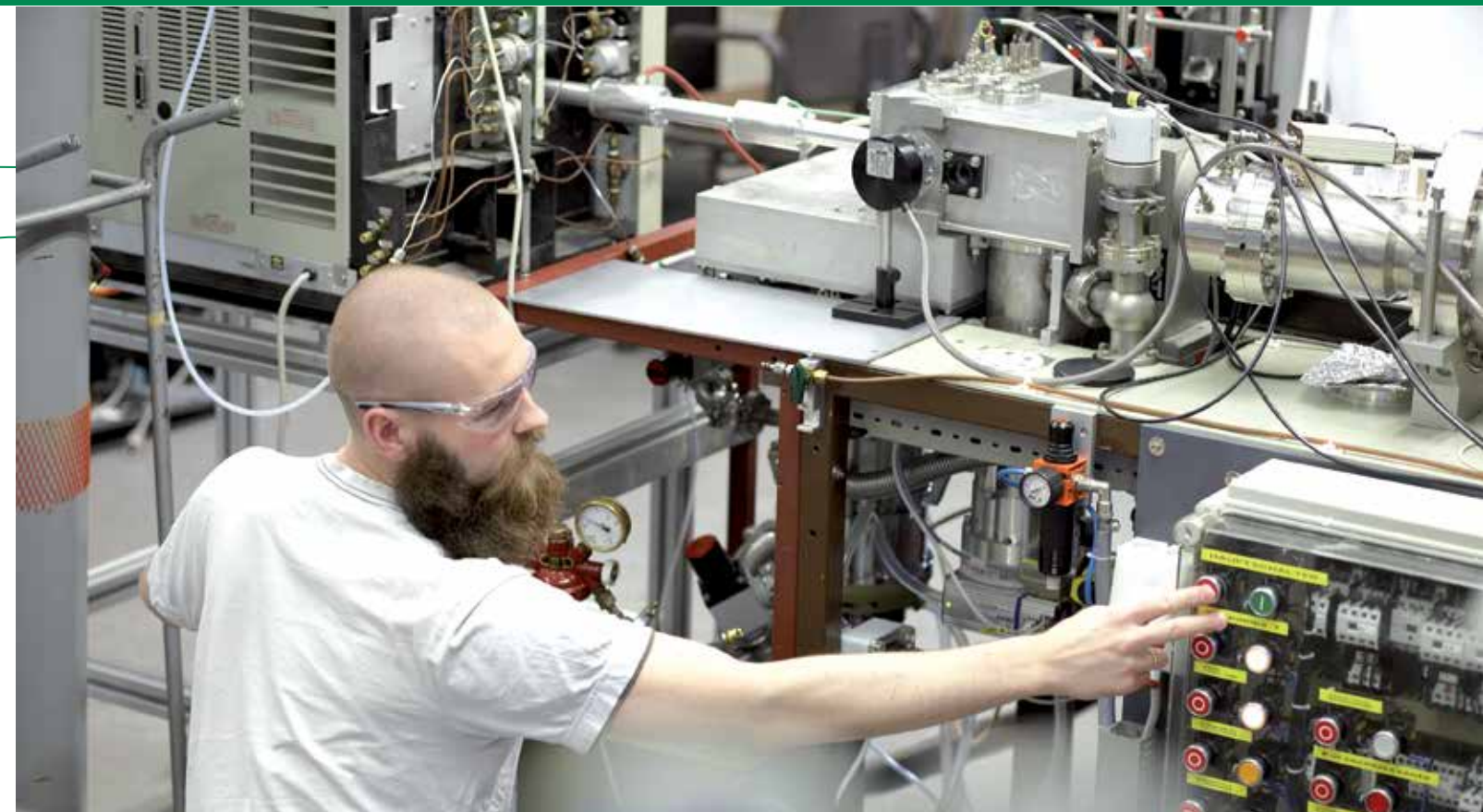


Abb. 2: Massenspektrometer im Einsatz.

lität der feinmechanischen Werkstatt der Fakultät für Mathematik und Naturwissenschaften, die Prototypen auf höchstem Niveau fertigt. Sowohl technische Entwicklungen als auch Grundlagenforschungsprojekte werden sehr häufig durch intensive computergestützte Simulationsarbeiten begleitet, die insbesondere durch die Aktivitäten von Dr. Walter Wißdorf als Leiter der Simulationsgruppe der Physikalischen und Theoretischen Chemie internationale Anerkennung erlangt haben. Das ipaMS stellt Forscherinnen und Forschern aus aller Welt die Geräteinfrastruktur für eigene Kurz- oder Langzeitprojekte zur Verfügung. Gemeinsam mit unseren zahlreichen Partnern suchen wir ständig nach neuen massenspektrometrischen Methoden. Zum Beispiel in der Krebsforschung mit der Organischen Chemie um Prof. Dr. Jürgen Scherkenbeck, zur Untersuchung von Emissionen aus Bauprodukten mit dem eco-INSTITUT Germany GmbH, zur Untersuchung von Abbauprodukten in der Atmosphäre mit der Arbeitsgruppe um Prof. Dr. Peter Wiesen oder in der Halbleiterindustrie mit Unternehmen wie der Zeiss SMT GmbH und ASML in Veldhoven/Niederlande.

#### Nachhaltiger Betrieb von Geräten

Häufig führen schon kleinere technische Störungen zum Stillstand des sehr teuren „Gesamtsystems Massenspektrometer“. Insbesondere an einer Universität ist der ebenfalls immer sehr kostenintensive Support durch entsprechende Dienstleister schlicht nicht immer möglich. Öffentliche Förderprogramme präferieren sogar Neuanschaffungen gegenüber Instandsetzungen. Das ipaMS ist hier ein Ansprechpartner für Arbeitsgruppen der Bergischen Universität, um entweder mit eigenen Bordmitteln technische Mängel zügig zu beheben oder gegebenenfalls geeignete Ansprechpartner zu vermitteln. Wir stellen ebenso die Nutzung der ipaMS-eigenen Geräteinfrastruktur für Messungen und Entwicklungen zur Verfügung.

[www.ipams.uni-wuppertal.de](http://www.ipams.uni-wuppertal.de)